

А. М. Миронов, канд. техн. наук, доцент, М. В. Ільченко, канд. техн. наук, доцент,
О. О. Гапонова, канд. техн. наук, доцент, Є. Д. Пономаренко, доцент,
К. О. Горбунов, канд. техн. наук, професор, С. М. Биканов, канд. техн. наук, доцент

МАТЕМАТИЧНЕ ТА ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ОБ'ЄМУ РОБОЧОГО СЕРЕДОВИЩА

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», Харків

Ключові слова: математичне моделювання, імітаційне моделювання, хімічний реактор, оптимізація, реактор ідеального змішування, CSTR, симуляція, DWSIM.

Вступ. У сучасній хімічній технології моделювання процесів є ключовим етапом при розробці та оптимізації обладнання. Одним із найпоширеніших об'єктів для досліджень у цьому контексті виступає реактор ідеального змішування (РІЗ), який виступає однією з базових моделей у хімічній інженерії. Його широке використання зумовлене простотою конструкції, передбачуваністю динаміки та можливістю математичного опису з достатньою точністю для реальних застосувань [1, 2].

Коректне математичне моделювання має дозволяти створювати формалізований опис фізико-хімічних процесів у реакторі на основі рівнянь балансу маси та енергії. Це забезпечує змогу аналізувати вплив різних параметрів на перебіг реакцій, передбачати поведінку системи за різних умов та визначати оптимальні режими роботи [3]. Проте математичне моделювання зазвичай потребує суттєвих спрощень, що може обмежувати точність отриманих результатів у складних або змінних режимах.

Через це дедалі більшого значення набуває імітаційне моделювання за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення. Інструментом даного дослідження обраний DWSIM – безкоштовне потужне середовища для хіміко-технологічного моделювання, яке підтримує побудову моделей з урахуванням реальних термодинамічних властивостей речовин, теплових ефектів, кінетики реакцій тощо [4, 5]. Імітаційні моделі, що реалізуються в DWSIM, базуються на тих самих принципах, що й математичні, але дозволяють уникати обмежень аналітичного вирішення складних задач.

Основним питанням, яке розглядається у роботі, є порівняння ефективності та точності математичних та імітаційних методів моделювання процесів у РІЗ. З одного боку, важливо обґрунтувати достовірність математичних моделей для подальшої імітації. З іншого – перевірити відповідність симуляцій результатам, очікуваним на основі теоретичних розрахунків. Мета роботи – дослідити принципи побудови математичної та імітаційної моделей реактора ідеального змішування, оцінити обмеження, порівняти потенційні результати та надати оцінку їх збіжності з фізичними процесами.

Аналіз літератури. Реактор ідеального змішування (англійське позначення – CSTR, Continuous Stirred Tank Reactor), є фундаментальною моделлю в теорії хімічної техніки. Властивість підтримувати однорідний склад в усьому об'ємі робить цю модель достатньо простою, контрольованою та зручною для розробки й перевірки математичного та комп'ютерного методів. У сучасній науковій літературі питання моде-

лювання РІЗ вкрай активно розглядаються як з точки зору побудови математичних моделей, так і з позицій комп'ютерної симуляції [1–3].

Класичні підходи до математичного опису РІЗ базуються на застосуванні диференціальних рівнянь балансу маси, що враховують надходження реагентів, швидкість реакції та витрати продуктів. Fogler [2] наводить розгорнутий аналіз як стаціонарного, так і нестаціонарного режиму роботи реактора, з акцентом на вплив кінетичних параметрів реакції. Вітчизняні дослідники, зокрема, Каспрук [1] та Лозовський [3], подають детальне пояснення методів лінеаризації та чисельного інтегрування рівнянь для багатостадійних реакцій у РІЗ.

Сучасна наукова література часто наголошує на важливості верифікації математичних моделей через чисельні експерименти. Зокрема, у роботі Towler і Sinnott [5] розглядаються приклади впровадження моделей РІЗ у процесах виробництва сірчаної кислоти та аміаку, а праці Писаренко [6] та Ніконова [7] висвітлюють методи апроксимації кінетичних даних та їх вплив на точність моделі.

Здійснювати потрібні експерименти за допомогою традиційних розрахунків – довго, втілювати фізично – вкрай витратно, але за допомогою імітаційного ПЗ, на кшталт DWSIM [4], такі задачі не лише багаторазово спрощуються, але й майже не вимагають видатків. Тому окрему групу становлять праці, присвячені виключно імітаційному моделюванню у спеціалізованому ПЗ. Зокрема, DWSIM нерідко використовується як гнучкий та потужний інструмент для моделювання ХТП [4, 8]. Відкритий код, інтеграція з базами фізико-хімічних даних (наприклад, DIPPR), підтримка усіх ключових моделей термодинаміки (Peng-Robinson, NRTL, UNIQUAC тощо) та реакційної кінетики робить його зручним для навчальних та дослідницьких цілей [9].

На практиці, ефективність симуляцій у DWSIM багато у чому залежить від якості математичних моделей, на основі яких вони побудовані. Цей зв'язок висвітлено, зокрема, в роботі Medina [10], де симуляції для РІЗ були порівняні з аналітичними рішеннями та даними реального експерименту. Подібні дослідження вказують на гарну збіжність між числовими результатами математичних та програмних моделей, за умови правильної постановки задачі.

Додатково варто відзначити внесок новітніх підходів, зокрема машинного навчання, у підвищення точності моделювання РІЗ. У роботі Misir [11] ідеться про поєднання емпіричних даних та гібридних моделей, де DWSIM використовується як джерело структурованих симуляційних даних для навчання нейромережових моделей. Це відкриває нові можливості для адаптивного контролю реакторів у режимі реального часу.

На українських теренах також проводяться активні дослідження. Наприклад, у практикумі [12] наведено численні приклади практичної реалізації математичних моделей для різних типів реакторів, зокрема РІЗ, з детальними методичними рекомендаціями щодо чисельного розв'язання систем рівнянь.

Таким чином, наявна література свідчить про високий рівень розробки математичних і імітаційних моделей реакторів ідеального змішування. Проте потреба у зіставленні цих підходів та оцінці їх відповідності реальним фізичним процесам залишається актуальною. Саме це й визначає доцільність подальших досліджень у даному напрямку.

Математичне моделювання. Модель РІЗ передбачає миттєве та повне змішування усіх реагентів в об'ємі реактора та дозволяє точно передбачити поведінку системи при сталому або змінному режимі роботи, забезпечуючи високу швидкість розрахунків та достатню точність у більшості технологічних задач [2, 3].

Математична модель РІЗ базується на принципі балансу маси, а у загальному випадку – балансу маси, енергії та імпульсу. Для найпростішої однорідної необерненої реакції першого порядку типу $A \rightarrow B$, математична модель у стаціонарному режимі зводиться до диференціального рівняння:

$$V \frac{dC_A}{dt} = F(C_{A0} - C_A) - V \cdot r_A(C_A), \quad (1)$$

де V – об'єм реактора, м^3 ; C_A – концентрація реагенту A у реакторі, $\text{моль}/\text{м}^3$; t – час, с ; C_{A0} – концентрація реагенту A на вході, $\text{моль}/\text{м}^3$; F – об'ємна витрата, $\text{м}^3/\text{с}$; $r_A(C_A)$ – швидкість реакції, $\text{моль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$.

Для реакції першого порядку $r_A = k \cdot C_A$, отже стаціонарне рівняння набуває вигляду:

$$0 = F(C_{A0} - C_A) - V k C_A. \quad (2)$$

Звідси можна отримати концентрацію реагенту A на виході:

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k \cdot \tau}, \quad (3)$$

де $\tau = V/F$ – середній час перебування речовини у реакторі.

У нестаціонарному режимі задача описується як початково-крайова для звичайного диференціального рівняння першого порядку:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F(C_{A0} - C_A)}{V} - k C_A, \quad (4)$$

що може бути вирішене чисельними методами, наприклад, методом Ейлера, Рунге-Кутти або вбудованими засобами інтегрування у MATLAB чи на мові Python [1, 12].

У разі наявності теплових ефектів модель просто доповнюється енергетичним балансом:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \frac{F \rho C_p (T_0 - T)}{V} + (-\Delta H) k C_A - U A (T - T_{сер}), \quad (5)$$

де ρ – густина, $\text{кг}/\text{м}^3$; C_p – питома теплоємність при сталому тиску, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; T_0 – температура вхідного потоку, К ; T – температура в реакторі, К ; ΔH – теплота реакції, $\text{Дж}/\text{моль}$; k – константа швидкості реакції, с^{-1} ; U – коефіцієнт тепловіддачі, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$; A – площа теплообміну, м^2 ; $T_{сер}$ – температура навколишнього середовища або охолоджувача, К [10].

З погляду фізичної репрезентації, можна стверджувати, що ліва частина рівняння описує накопичення тепла у системі, перший доданок праворуч – тепло, що надходить із вхідним потоком, другий – тепловий ефект хімічної реакції, а третій – теплообмін із навколишнім середовищем через стінки реактора. Здебільшого це рівняння застосовується для нестаціонарного (перехідного) режиму роботи реактора. З практичної

точки зору така модель РІЗ може застосовуватися при аналізі кінетичних закономірностей, проектуванні та масштабуванні хімічних реакторів, моделюванні перехідних процесів (наприклад, моментів запуску установки) та оптимізації технологічних режимів.

Важливою перевагою математичної моделі РІЗ є можливість узагальнення на випадки багатокомпонентних, багатостадійних або оборотних реакцій. Такі модифікації моделі описані у працях Лозовського [3] та Misir [11].

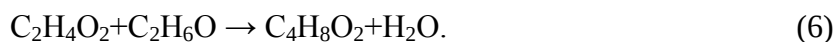
Хоча модель РІЗ ідеалізує поведінку реального реактора (повне змішування, відсутність градієнтів концентрації чи температури в об'ємі), численні експериментальні дослідження показали її високу адекватність у системах з інтенсивним перемішуванням і низькою в'язкістю [7, 13]. Особливо ефективною вона є в умовах неперервного виробництва, коли динаміка системи визначається не локальними, а глобальними параметрами. Однак у випадках сильно ендотермічних чи екзотермічних реакцій, нестабільної гідродинаміки або фазових переходів застосування базової моделі РІЗ може бути недостатнім – тоді її доповнюють розширеними варіантами з врахуванням теплових втрат, фазових меж або неоднорідностей потоку [6].

Загалом, математичне моделювання РІЗ дозволяє ще на етапі проектування виявити потенційні «вузькі місця» у роботі установки, проаналізувати чутливість системи до змін параметрів, знизити витрати на експерименти та мінімізувати ризики техногенних збоїв. Як показано в дослідженнях Писаренка [6] та Medina [10], коректно побудована модель здатна відтворити ключові характеристики процесу з точністю до 6–10 %.

Водночас, самі по собі математичні моделі, незважаючи на свою наочність та формальну строгість, обмежені з точки зору інтеграції великого обсягу емпіричних та фізико-хімічних даних. Саме тут на перший план виходить імітаційне моделювання, яке дозволяє реалізувати математичну основу у вигляді повноцінної цифрової моделі з урахуванням специфіки речовин, теплообмінних умов, реальних розмірів апаратів і навіть аварійних сценаріїв.

Імітаційне моделювання. Імітаційне моделювання РІЗ у DWSIM є етапом перевірки адекватності математичних припущень щодо реальної фізико-хімічної поведінки системи. У цьому дослідженні у якості об'єкту моделювання обрано процес етерифікації – взаємодія етанолу та оцтової кислоти з утворенням етилацетату та води у безперервному режимі з використанням реактора CSTR. Метою є відтворення умов, близьких до лабораторних або промислових, у яких дійсно можна дослідити характер переносу маси, термодинамічну взаємодію компонентів та, за потреби, розглядати потенційну реакційну взаємодію чи теплові ефекти.

У середовищі DWSIM схемним елементом, який реалізує базову модель РІЗ, виступає Continuous Stirred Tank Reactor. Основними вхідними параметрами є оціночний об'єм реактора, температура та тиск на вході, склад та масова витрата вхідного потоку та термодинамічний пакет для точного врахування міжмолекулярних взаємодій. У якості базової хімічної реакції моделюється наступна:



На виробництві процес є оборотним, гомогенним та каталізується кислотами. У нашому випадку модель будується з припущенням ізотермічних умов, що дозволяє спростити енергетичний баланс без втрати релевантності для лабораторного чи промислового масштабу.

Зазвичай прості симуляції у DWSIM починаються зі створення потоків реагентів з визначенням їхніх базових параметрів. Для спрощення демонстраційної моделі одразу обрано базові компоненти задачі та сформовано потік «Живлення реактора», що має наступний компонентний склад за мольними долями: етанол – 48 %, оцтова кислота – 50 % та вода – 2 % (щоб наблизити умови до реальних, у яких майже будь-який реактив містить залишки води). Звісно, що етилацетат, який стане головним продуктом реакції, у складі цього потоку відсутній. Суміш має температуру 70 °C та тиск 100 кПа. Масова витрата складає 1 кг/с. Параметри потоку «Живлення реактора» показані на рис. 1.

Compound	Amount
Ethanol	0,48
Acetic acid	0,5
Ethyl acetate	0
Water	0,02

Stream Conditions: Temperature 70,00 C, Pressure 100,00 kPa, Mass Flow 1,00 kg/s

Рисунок 1 – Ключові параметри потоку «Живлення реактора»

Обраний термодинамічний пакет NRTL (Non-Random Two-Liquid) дозволяє враховувати неідеальну поведінку компонентів у рідкій фазі. Система, що містить полярні сполуки, демонструє сильні міжмолекулярні взаємодії, які значною мірою впливають на фазову рівновагу. Саме модель NRTL здатна точно описати активність кожного компонента через облік енергії взаємодій між подібними й відмінними молекулами, що істотно підвищує точність симуляції у порівнянні з ідеальними моделями на основі закону Рауля [8].

Для відтворення хімічної реакції (6) задані компоненти-учасники кінетичної реакції, а у якості базового компоненту використовується етанол. Детальні налаштування реакції, яка відбувається у РІЗ, представлено на рис. 2.

Name	Molar Weight	ΔHf (kJ/kg)	Include	BC	Stoich. Coeff.	DO	RO
Ethanol	46,0684	-5100,02	☒	☒	-1	1	0
Acetic acid	60,052	-7207,09	☒	☐	-1	1	0
Ethyl acetate	88,1051	-5045,11	☒	☐	1	0	0
Water	18,0153	-13422,7	☒	☐	1	0	0

Equation: CH3CH2OH + CH3COOH <=> CH3COOC2H5 + H2O

Kinetic Reaction Parameters: Base Component: Ethanol, Phase: Liquid, Kinetics Specification: Simple, Rate Units: kmol/(m3.s)

Рисунок 2 – Налаштування кінетичної реакції у РІЗ

Кінетична модель реакції будується просто на основі закону діючих мас:

$$r = k_1 \cdot C_{EtOH} \cdot C_{HAc} - k_2 \cdot C_{EtAc} \cdot C_{H_2O}, \quad (7)$$

де r – швидкість реакції, моль/(м³·с); C_{EtOH} , C_{HAc} , C_{EtAc} , C_{H_2O} – концентрації етанолу, оцтової кислоти, етилацетату та води відповідно, моль/м³; k_1 , k_2 – прямі та зворотні константи швидкості реакції, 1/(моль·с).

Потік живлення подається до схемного об'єкту CSTR, який імітує реактор. У налаштуваннях задається початковий (пробний) об'єм реактора (0,1 м³) та ізотермічний режим його роботи. Програма автоматично підбиває баланс маси та енергії на основі внутрішнього чисельного ядра, яке використовує алгоритми, еквівалентні класичним методам чисельного інтегрування, наприклад, методу Ньютона-Рафсона чи модифікаціям Рунге-Кутти [8].

У процесі змішування виділяється значна кількість теплової енергії, що не тільки призводить до зниження температури продукту реактора, але й визначає необхідність підведення до нього енергетичного потоку – рис. 3.

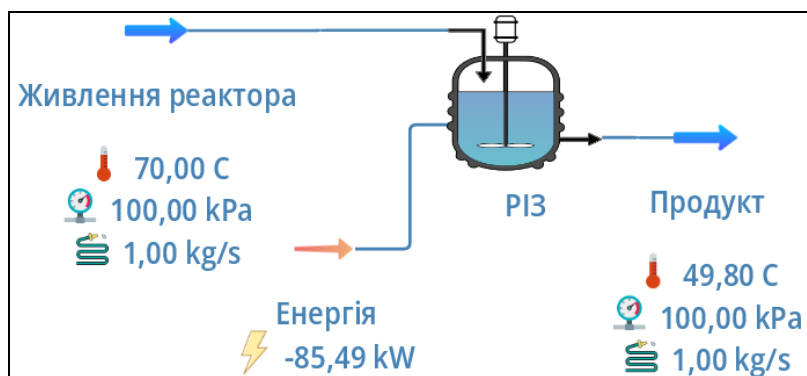


Рисунок 3 – Налаштування кінетичної реакції у РІЗ

У поточній задачі деталі реакційної взаємодії не моделюються, й головним є коректне відтворення процесу змішування та фазової рівноваги. Водночас, вкрай важливим є досягнення високої ступені конверсії речовин, які вступили у реакцію. У схемі з рис. 3 у реакторі досягаються надто низькі для промислових умов показники – рис. 4.

Results	
General	Reactions
Compound	Conversion (%)
Ethanol	60,8313
Acetic acid	58,398

Рисунок 4 – Ступінь конверсії реагентів у реакторі з пробним об'ємом

Бажана ступінь конверсії базового компоненту (етанолу) має складати не менше 98 %. Цю проблему можна вирішити шляхом встановлення спеціальної логічної операції Controller Block, яка зможе підібрати потрібний реакційний об'єм для досягнення вказаного показника. Цей схемний елемент налаштовано таким чином, щоб варіювання

об'єму реактора призводило до змін у ступені конверсії етанолу до моменту досягнення бажаної величини (з урахуванням припустимої похибки) – рис. 5.

Object: Операція підбору

Linked Objects

Manipulated Object: PI3

Manipulated Property: Volume

Current Value: 0,1 m3

Controlled Object: PI3

Controlled Property: Ethanol: Conversion

Current Value: 60,8313 (+59,8313) %

☐ Reference Object

Reference Property

Current Value

Parameters

☒ Converge/Solve with Flowsheet Solver

Set-Point/Offset (Controlled Property): 98

Tolerance (Maximum Error): 0,0001

Рисунок 5 – Налаштування логічної операції підбору реакційного об'єму

Результатом роботи операції підбору є досягнення цільового показника конверсії етанолу та збільшення конверсії оцтової кислоти з 58,398 % до 94,08 %. При цьому за розрахунками програми реальний (оптимізований) об'єм реактора повинен становити 21,33 м³, а температура продукту стабілізована на рівні потоку живлення – рис. 6.

Calculation Parameters

Reaction Set: Реакція

Calculation Mode: Isothermic

Outlet Temperature: 70 C

Reactor Volume: 21,3274 m3

Headspace: 0 m3

Reactor Pressure Drop: 0 kPa

Catalyst Amount: 0 kg

Results

General Reactions Conversions

Compound	Conversion (%)
Ethanol	98
Acetic acid	94,08

Рисунок 6 – Результат логічної операції підбору реакційного об'єму

При цьому після оптимізації об'єму реактора компонентний склад продуктового потоку також змінився потрібним чином (від стану на рис. 7а до стану на рис 7б) та почав відповідати цілям виробництва. Аналіз даних з рис. 7 чітко демонструє, що про-бний об'єм реактора був абсолютно недостатнім для ефективного перемішування реа-

гентів та підкреслює важливість підбору окремих величин для збільшення адекватності імітаційних моделей. На прикладі цієї задачі можна аналогічним чином здійснювати оцінку впливу окремих параметрів (температур, тисків, співвідношення компонентів, об'єму реактора) на розподіл концентрацій речовин у продуктовому потоці, готуватися до практичних експериментів або масштабування процесу.

Input Data Results Annotations Dynamics Floating Tables

Compounds Phase Properties

Amounts Properties

Basis Mole Fractions

☒ Show as percentages

Mixture Liquid 1

Compound	Amount
Ethanol	18,800984
Acetic acid	20,800984
Ethyl acetate	29,199016
Water	31,199016

a

Input Data Results Annotations Dynamics Floating Tables

Compounds Phase Properties

Amounts Properties

Basis Mole Fractions

☒ Show as percentages

Mixture Liquid 1

Compound	Amount
Ethanol	0,96000829
Acetic acid	2,9600083
Ethyl acetate	47,039992
Water	49,039992

б

Рисунок 7 – Компонентний склад потоку продукту реактору:
а – для пробного об'єму 0,1 м³; б – для оптимізованого об'єму 21,33 м³

Імітаційна модель розробленої технологічної схеми з оптимізованими параметрами РІЗ та ключовими характеристиками потоків наведена на рис. 8.

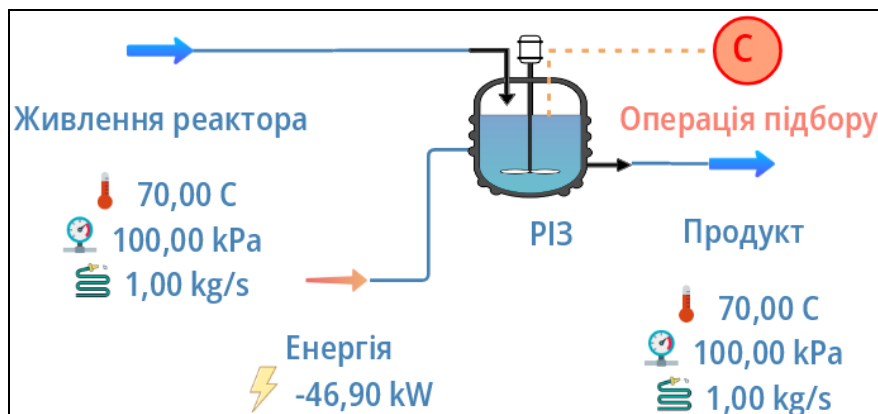


Рисунок 8 – Технологічна схема з оптимізованими параметрами РІЗ

Обговорення результатів

Не дивлячись на структурну простоту, змодельована система має значну практичну цінність. Реакція естерифікації широко використовується у виробництві розчинників, ароматизаторів та проміжних фармацевтичних продуктів. Саме тому можливість точно описувати процес у реакторі є критичною для оптимізації виробництва, забезпечення якості продукції та економічної ефективності.

Адекватність моделей підтверджується тим, що DWSIM використовує ті ж самі базові рівняння масового та енергетичного балансу, що й традиційна математична модель, але автоматизує обчислення і враховує більш повний спектр фізичних факторів. Завдяки цьому симуляція дозволяє побачити, наскільки зміщення певного параметру змінює весь процес, що доволі важко та довго втілюється при ручному розрахунку.

Математична модель РІЗ, побудована на основі диференціальних рівнянь масового балансу та закону діючих мас, дозволяє досить точно описати перебіг реакції в ідеалізованих умовах. Вона надає можливість швидко оцінити вплив початкових концентрацій, часу перебування, об'єму реактора та кінетичних констант на кінцевий вихід продуктів. Особливістю такого підходу є його прозорість і контрольованість – інженер чітко розуміє, які змінні впливають на результат, і як саме. Однак цей тип моделювання потребує численних спрощень – припущення про ідеальне змішування, постійну температуру, відсутність теплових втрат та ідеальну термодинамічну поведінку, що обмежує його застосування для реальних промислових процесів, у яких фактори міжмолекулярної взаємодії, фазових переходів або неоднорідностей середовища можуть суттєво впливати на результат.

У свою чергу, імітаційне моделювання в DWSIM дозволило значно глибше і реалістичніше відтворити перебіг процесу. Завдяки використанню термодинамічного пакету NRTL враховано неідеальну поведінку системи, зокрема активність кожного з компонентів у рідкій фазі. Можливість врахування зворотної реакції та точного завдання концентрацій, температур та витрат у реальних одиницях, а також автоматичне розв'язання рівнянь системи з підбором цільового параметру роблять симуляцію точнішою та ближчою до виробничої реальності та прикладних проєктувальницьких задач.

Цей результат підтверджує, що математична модель є достатньою для попереднього проєктного аналізу або швидкої оцінки системи. Водночас імітаційне моделювання доцільно використовувати на пізніших етапах – при деталізації параметрів, адаптації до конкретного обладнання, розробці технічних регламентів або для навчання персоналу. Особливо корисною така модель є у випадках, коли потрібно швидко оцінити реакцію системи на зміну одного або кількох параметрів у широкому діапазоні.

З огляду на вищезазначене, можна стверджувати, що поєднання математичного та імітаційного моделювання є оптимальною стратегією для інженерного аналізу РІЗ. Це дозволяє отримувати як фундаментальні висновки, так і високоточні симуляції, які гарно відповідають умовам реального виробничого процесу.

Висновки

У ході дослідження здійснено описове математичне та імітаційне моделювання процесу естерифікації етанолу та оцтової кислоти у реакторі ідеального змішування. Аналітична модель продемонструвала свою ефективність для попереднього аналізу та оцінки впливу основних параметрів на хід реакції. Вона є швидким і точним інструментом при відносно простих умовах моделювання. Імітаційна модель, реалізована у DWSIM із використанням термодинамічного пакету NRTL, дозволила детально змодельовувати процес із врахуванням неідеальностей системи та зворотної реакції. Вона виявилась більш точною та гнучкою, зручнішою для практичного застосування, зокрема на етапі оптимізації та адаптації до реального обладнання. Загалом, поєднання математичних та імітаційних моделей дає змогу глибоко досліджувати хімічні процеси, підвищувати їхню ефективність і забезпечувати надійність технологічних рішень у сучасній хімічній інженерії.

Література

1. Каспрук О. А. Основи математичного моделювання хіміко-технологічних процесів : навч. посіб. Київ : НУХТ, 2014. 236 с.

2. Fogler H. S. Elements of Chemical Reaction Engineering. 5th ed. Pearson Education, 2016. 992 p.
3. Лозовський І. М. Математичне моделювання процесів у хімічних реакторах. Львів : Видавництво Львівської політехніки, 2008. 168 с.
4. Medeiros D. DWSIM – Open Source Process Simulator. URL: <https://dwsim.org>.
5. Towler G., Sinnott R. Chemical Engineering Design. 2nd ed. Elsevier, 2012. 1320 p.
6. Писаренко І. І. Математичне моделювання хімічних реакційних систем. Київ : Техніка, 2007. 192 с.
7. Ніконов І. А. Основи моделювання процесів у хімічній технології. Харків : ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2015. 211 с.
8. DWSIM Documentation. URL: <https://docs.dwsim.io>.
9. Soares A. Modeling chemical reactors in DWSIM : Tutorial and examples. São Paulo : DWSIM Tutorials, 2021.
10. Medina A., Rodríguez R., Barajas J. Comparison of CSTR performance: mathematical model vs. simulation in DWSIM. *Computers & Chemical Engineering*. 2020. Vol. 135. P. 106744.
11. Misir M., Altıntaş D., Kıran Ş. Hybrid modeling of chemical reactors using DWSIM and machine learning algorithms. *Chemical Engineering Science*. 2022. Vol. 253. P. 117532.
12. Математичне моделювання хіміко-технологічних процесів. Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: А. О. Абрамова. – Електронні текстові дані (1 файл: 2,75 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 114 с.
13. Бедрій А. В. Основи чисельних методів у хімічній інженерії : навч. посіб. Дніпро : НГУ, 2016. 190 с.
14. Лантухова О. Г. Дослідження гідродинаміки реакторів із змішуванням. Харків : ХТУРЕ, 2014. 145 с.

Bibliography (transliterated)

1. Kaspruk O. A. (2014). Osnovy matematychnoho modeliuvannia khimiko-tekhnologichnykh protsesiv: navch. posib. Kyiv: NUKhT, 236 p.
2. Fogler H. S. (2016). Elements of Chemical Reaction Engineering. 5th ed. Pearson Education, 992 p.
3. Lozovskyi I. M. (2008). Matematychno modeliuvannia protsesiv u khimichnykh reaktorakh. – Lviv: Vydavnytstvo Lvivskoi politekhniki, 168 p.
4. Medeiros D. DWSIM – Open Source Process Simulator. URL: <https://dwsim.org>.
5. Towler G., Sinnott R. (2012). Chemical Engineering Design. 2nd ed. Elsevier, 1320 p.
6. Pysarenko I. I. (2007). Matematychno modeliuvannia khimichnykh reaktsiinykh system. Kyiv: Tekhnika, 192 p.
7. Nikonov I. A. (2015). Osnovy modeliuvannia protsesiv u khimichnii tekhnolohii. Kharkiv: KhNU im. V. N. Karazina, 211 p.
8. DWSIM Documentation. URL: <https://docs.dwsim.io>
9. Soares A. (2021). Modeling chemical reactors in DWSIM: Tutorial and examples. São Paulo: DWSIM Tutorials.

10. Medina A., Rodríguez R., Barajas J. (2020). Comparison of CSTR performance: mathematical model vs. simulation in DWSIM. *Computers & Chemical Engineering*, 135, 106744.
11. Misir M., Altıntaş D., Kıran Ş. (2022). Hybrid modeling of chemical reactors using DWSIM and machine learning algorithms. *Chemical Engineering Science*, 253, 117532.
12. Matematychnе modeliuvannia khimiko-tekhnologichnykh protsesiv. Kompiuternyi praktykum 2023. [Elektronnyi resurs]: navch. posib. dlia stud. spetsialnosti 161 «Khimichni tekhnologii ta inzheneriia». KPI im. Ihoria Sikorskoho ; uklad. A. O. Abramova. – Elektronni tekstovi danni (1 fail: 2,75 Mbait). Kyiv: KPI im. Ihoria Sikorskoho, 114 p.
13. Bedrii A. V. (2016). Osnovy chyselnykh metodiv u khimichnii inzhenerii : navch. posib. Dnipro: NHU, 190 p.
14. Lantukhova O. H. (2014). Doslidzhennia hidrodynamiky reaktoriv iz zmishuvanniam. Kharkiv: KhTURE, 145 p.

УДК 62-92:66.01

А. М. Миронов, М. В. Ільченко, О. О. Гапонова, Є. Д. Пономаренко, К. О. Горбунов,
С. М. Биканов

МАТЕМАТИЧНЕ ТА ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ОБ'ЄМУ РОБОЧОГО СЕРЕДОВИЩА

У статті наведено результати дослідження, присвяченого математичному та імітаційному моделюванню реактора ідеального змішування (PIЗ) із метою оптимізації об'єму робочого середовища для процесу етерифікації оцтової кислоти етанолом. Розглянуто класичні підходи до побудови математичних моделей на основі рівнянь балансу маси та енергії, у тому числі для випадків стаціонарного та нестаціонарного режимів. Визначено переваги аналітичних методів для початкового аналізу та попередніх розрахунків за наявності відносно простих технологічних умов. Показано, що математична модель дозволяє з достатньою точністю оцінити динаміку змін концентрацій та обґрунтувати технологічні параметри при проектуванні ключового виробничого обладнання.

Особливу увагу приділено побудові імітаційної моделі у середовищі DWSIM з використанням термодинамічного пакету NRTL, що забезпечує точне відтворення неідеальної поведінки полярних компонентів рідкої фази. Симульовано оборотну гомогенну кінетичну реакцію етерифікації у безперервному режимі в умовах ізотермічної експлуатації реактора ідеального змішування. За результатами симуляції визначено ступені конверсії реагентів, а також встановлено, що початково заданий об'єм реактора є недостатнім для досягнення промислових показників. Запропоновано використання логічного блоку керування для автоматичного підбору оптимального об'єму, що дозволяє досягти необхідної глибини перетворення базового реагенту (етанолу) понад 98 %.

Проведено порівняльний аналіз результатів математичного та симуляційного моделювання, який вказує на високу адекватність математичних моделей при їх правильній постановці для оцінки базових характеристик технологічного процесу та параметрів обладнання. Підкреслено, що імітаційне моделювання дозволяє враховувати набагато ширший спектр фізико-хімічних факторів, адаптуватися до конкретних умов виробництва, а також швидко досліджувати вплив технологічних змін без потреби у фізичних експериментах. Стаття доводить доцільність поєднання обох підходів у практиці

комп'ютерної хімічної інженерії для забезпечення максимальної точності, гнучкості, надійності та технологічної ефективності рішень.

Ключові слова: математичне моделювання, імітаційне моделювання, хімічний реактор, оптимізація, реактор ідеального змішування, CSTR, симуляція, DWSIM.

A. M. Myronov, M. V. Ilchenko, O. O. Gaponova, Ye. D. Ponomarenko, K. O. Gorbunov,
S. M. Bykanov

MATHEMATICAL AND SIMULATION MODELLING OF AN IDEAL MIXING CHEMICAL REACTOR FOR OPERATING ENVIRONMENT VOLUME OPTIMISING

The article presents the results of a comprehensive study of mathematical and simulation modeling of a continuous stirred tank reactor (CSTR) aimed at optimizing the operating volume during the esterification of acetic acid with ethanol. Classical approaches to building mathematical models based on mass and energy balance equations, including stationary and non-stationary regimes, are analyzed. The analytical methods are shown to be effective for preliminary process analysis and parameter estimation under relatively simple technological conditions. The mathematical model is demonstrated to predict dynamics of changes in concentrations and justify technological parameters when designing key production equipment with acceptable accuracy.

Special focus is given to the simulation of the CSTR in the DWSIM environment using the NRTL (Non-Random Two-Liquid) thermodynamic model, which accurately captures the non-ideal interactions of polar liquid-phase components. A reversible homogeneous kinetic esterification reaction was simulated under isothermal conditions in a continuous mode. The simulation results included evaluation of reactant conversion levels and showed that the initial reactor volume was insufficient to reach industrial-level conversion. To solve this, a controller block was implemented to automatically select the optimal reactor volume needed to achieve over 98 % conversion of the base reactant (ethanol).

A comparative analysis of mathematical and simulation results modeling was conducted, which indicates the high adequacy of mathematical models when they are properly defined for assessing the basic characteristics of the technological process and equipment parameters. Underlined that simulation modeling in DWSIM provides the advantage of integrating a broader range of physical and chemical parameters, adapting to real process conditions, and exploring variable scenarios without conducting physical experiments. The paper substantiates the practical value of combining both modeling approaches to enhance maximum accuracy, flexibility, robustness, and process efficiency in practices of computer chemical engineering and equipment design decisions.

Keywords: mathematical modelling, simulation modelling, chemical reactor, optimization, ideal mixing reactor, CSTR, simulation, DWSIM.